

(12) NACH DEM VERTRAG ÜBER DIE INTERNATIONALE ZUSAMMENARBEIT AUF DEM GEBIET DES
PATENTWESENS (PCT) VERÖFFENTLICHTE INTERNATIONALE ANMELDUNG

(19) Weltorganisation für geistiges Eigentum
Internationales Büro



(43) Internationales Veröffentlichungsdatum
24. Februar 2005 (24.02.2005)

PCT

(10) Internationale Veröffentlichungsnummer
WO 2005/017533 A1

(51) Internationale Patentklassifikation⁷: **G01N 33/68**,
B01J 19/00, C30B 7/00

(71) Anmelder (für alle Bestimmungsstaaten mit Ausnahme
von US): **PROTEROS BIOSTRUCTURES GMBH**
[DE/DE]; Am klopferspitz 19, 82152 Martinsried (DE).

(21) Internationales Aktenzeichen: PCT/EP2004/008813

(22) Internationales Anmeldedatum:
6. August 2004 (06.08.2004)

(72) Erfinder; und

(75) Erfinder/Anmelder (nur für US): **NEUEFEIND, Torsten**
[DE/DE]; Am Weiher 3a, 82131 Gauting (DE). **BRAND-
STETTER, Hans** [DE/DE]; Am Weiher 25, 82131 Gaut-
ing (DE). **KIEFERSAUER, Reiner** [DE/DE]; Brodwastl-
weg 9, 82061 Neuried (DE).

(25) Einreichungssprache: Deutsch

(26) Veröffentlichungssprache: Deutsch

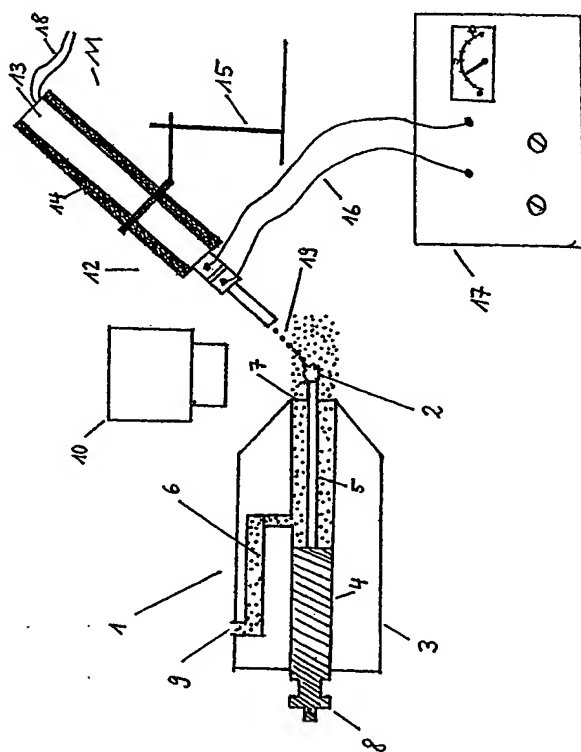
(30) Angaben zur Priorität:
103 36 110.3 6. August 2003 (06.08.2003) DE
04001722.0 27. Januar 2004 (27.01.2004) EP

(74) Anwälte: **GRAF VON STOSCH, Andreas** usw.; Bosch,
Graf von Stosch, Jehle, Flüggenstr. 13, 80639 München
(DE).

[Fortsetzung auf der nächsten Seite]

(54) Title: METHOD FOR IDENTIFYING WEAKLY BINDING MOLECULE FRAGMENTS HAVING LIGAND PROPERTIES, WHEREBY THE MOLECULE FRAGMENTS ARE APPLIED IN THE FORM OF MICRODROPS OF A CORRESPONDING SOLUTION TO THE CRYSTAL

(54) Bezeichnung: VERFAHREN ZUR IDENTIFIZIERUNG VON SCHWACH BINDENDEN MOLEKÜLFRAGMENTEN MIT LIGANDENEIGENSCHAFTEN, WOBEI DIE MOLEKÜLFRAGMENTE ALS MIKROTROPFEN EINER ENTSPRECHENDEN LÖSUNG AUF DEN KRISTALL AUFGEBRACHT WERDEN



(57) Abstract: The invention relates to a method for treating a crystal with a solution, whereby the solution contains one or more molecular species and the molecules of the molecular species typically have a molecular weight of < 500 Da. The use of this method enables weakly binding small molecules or molecule fragments to be identified on target structures and their binding position to be determined by subsequent x-ray crystallographic examinations.

(57) Zusammenfassung: Die vorliegende Erfindung betrifft ein Verfahren zum Behandeln eines Kristalls mit einer Lösung, wobei die Lösung eine oder mehr Molekülspezies enthält und wobei die Moleküle der Molekülspezies typischerweise ein Molekulargewicht von < 500 Da aufweisen. Mit Hilfe dieses Verfahrens können auf Targetstrukturen schwach bindende kleine Moleküle oder Molekülfragmente identifiziert und deren Bindungsposition durch nachfolgende röntgenkristallographische Untersuchungen ermittelt werden.

WO 2005/017533 A1



(81) **Bestimmungsstaaten** (soweit nicht anders angegeben, für jede verfügbare nationale Schutzrechtsart): AE, AG, AL, AM, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, HR, HU, ID, IL, IN, IS, JP, KE, KG, KP, KR, KZ, LC, LK, LR, LS, LT, LU, LV, MA, MD, MG, MK, MN, MW, MX, MZ, NA, NI, NO, NZ, OM, PG, PH, PL, PT, RO, RU, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SY, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, YU, ZA, ZM, ZW.

(84) **Bestimmungsstaaten** (soweit nicht anders angegeben, für jede verfügbare regionale Schutzrechtsart): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LS, MW, MZ, NA, SD, SL, SZ, TZ, UG,

ZM, ZW), eurasisches (AM, AZ, BY, KG, KZ, MD, RU, TJ, TM), europäisches (AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HU, IE, IT, LU, MC, NL, PL, PT, RO, SE, SI, SK, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

Veröffentlicht:

— mit internationalem Recherchenbericht

Zur Erklärung der Zweibuchstaben-Codes und der anderen Abkürzungen wird auf die Erklärungen ("Guidance Notes on Codes and Abbreviations") am Anfang jeder regulären Ausgabe der PCT-Gazette verwiesen.